

第4部門Aの研究活動に関する報告

(平成21年度)

研究課題名：樹脂製品の強度剛性を高める新しい 方法の基礎的研究と応用研究

石鍋雅夫*, 山下義裕**, 今枝健一***

Masao Ishinabe*, Yoshihiro Yamashita** and Kenichi Imaeda***

Abstract: We are executing the fundamental research to search for a new method of improving the hardness rigidity of the plastic product. We have taken up the poly(ethyleneterephthalate) (PET) bottle for heat resistance used for drinks as a subject of research. Because the PET bottle shrinks remarkably according to the heat of contents when contents of about 100°C(liquid) are filled, the polymer design that endures it is needed. We are examining a new trial from various angles for this purpose. We pay attention to the end combination of the molecule chain in the crystallization and study it

Keywords : PET, High extension, Crystallization, Heat shrink

1. はじめに

樹脂製品の強度剛性を高める新しい方法を導くための基礎研究を実施している.研究対象として,お茶などに利用される耐熱用ポリエチレンテレフタレート (PET) ボトルを取り上げている.PET ボトルには2種類あり,ホットパックと呼ばれる100℃程度の内容物(液体)の充填するボトルでは,充填時の内容物の熱により著しく収縮するため,それに耐える工程が実施されている.

結晶性高分子であるPET樹脂を,予めプリフォーム(試験管形状)に成形し,100℃程度のガラス転移点T_g程度の温度にて,内側から棒で軸方向に延伸後,直ちに120℃程度の高温・30気圧程度の内圧の空気によって,一気に膨らませてボトルに成型するが,大量生産に対応するために,ブローと収縮する変化を工程内で繰り返すブロー成形法が用いられる.

より一般的には,150℃程度の熱により熱結晶させる方法をとるが,これらは,PETが伸長した状態で伸長による結晶化だけでは,耐熱性を持たないためであり,熱結晶状態を得るための熱処理が必要とされ,産業会においても,エコの意味でも重要な研究課題である.

我々はこの目的のために,様々な角度で従来の方法や既に研究されている方法を調べ,新たな方策の可能性を検討している.

* 中部大学工学部工学基礎教室 准教授 ** 滋賀県立大学工学部材料科学科 講師

*** 中部大学工学部応用化学科 教授

2. 研究の方向性

その１）結晶性高分子 PET の伸長及び熱結晶化の違いに関する過去の研究からの知見

樹脂は一般的には、温度依存があり、粘性体やゴム弾性体とされている。しかし、PET などの結晶性高分子では、熱による結晶構造、伸長による結晶構造が材料の剛性や強度に関係している。剛性や強度を高める研究として、一般的には結晶化度を高める方向で研究や応用が進んでいる。

その中で、分子鎖間の結合の仕組みが材料全体の機械特性に関係しているという認識に立った研究¹⁾が報告されており、我々はその立場にたって新しい方法の提案を目指している。

その２）試験による特徴の把握

新しい方法を見出すには、今まで認識を覆す実験結果が必要である。我々は、耐熱ボトルと同じ材料の PET フィルムを用いて様々な試験をしている。今までの知見では説明できないと判断する結果を得ている。すなわち、様々な成型条件下でどのような分子鎖間の結合が生じているかは完全には未だ解明できていないと判断している。

その３）FTIR, X 線構造解析

総合工学研究所の X 線構造解析システムの利用、応用化学科の FTIR を利用して、結晶構造他の解明を検討している。

その４）分子シミュレーション

分子鎖の代表的な構成（ベンゼン環やカルボニル基）などから、計算可能な量子化学計算（DFT）を Gaussian を用いて実施している。また、ペプチド化合物の結晶で見られたベンゼン環-水分子の水素結合の例²⁾などを参照し、特殊な分子間相互作用の可能性をも考慮しつつ、試行的に分子動力学法による検討も実施している。

その５）共同研究体制

共同研究者の石鍋と山下は容器産業分野の研究者としての経験を経ており、石鍋は自動車関係の軽量化技術に関する FEM 技術の開発を長年実施してきた。山下は樹脂特にゴムなどの材料の科学者である。今枝は電気化学など他幅広い化学者である。お互いの違った知見をもって、新しい可能性を相談して実施している。

3. 研究成果

今までに、本目的に対応する方向での材料モデルの提案を論文にして学会に提出している。また、実験事実に対しての解明から特許を出願している。

4. 参考文献

- 1) Kenneth C. Cole, Abdellah Ajji and Eric Pellerin, New Insights into the Development of Ordered Structure in PET: Macromolecules, 2002, Vol.35, No.3, P770-784
- 2) Hydrogen Bond between Water and the Phenyl Ring in the Structure of a Dipeptide H-Phe-Leu-NH₂ at 90K and the Structure-based Energy Estimations Mitsunobu Doi, Akiko Asano and Daisuke Yamamoto, Chemistry Letters, 2003, Vol.32, No.12, P1102-1103